COMPORTAMIENTO ASINTOTICO DE LOS METODOS NUMERICOS REVERSIBLES AL INTEGRAR ORBITAS PERIODICAS

B. Cano, J.M. Sanz Serna

Departamento de Matemática Aplicada y Computación, Universidad de Valladolid, Facultad de Ciencias, Prado de la Magdalena, s/n , 47005-Valladolid.

1 Introducción

Los resultados que se van a mostrar son relativos a la integración numérica de sistemas reversibles. Más concretamente, problemas de valores iniciales correspondientes a ecuaciones diferenciales ordinarias de la forma

$$\begin{aligned} &\dot{x} = f(x) \\ &x(t_0) = x_0 \in R^d \end{aligned} \tag{1.1}$$

siendo f una función suficientemente lisa y para la cual existe una aplicación lineal ρ involutiva, es decir $\rho^2 = I$, cumpliendo que

$$\rho f(x) = -f(\rho x). \tag{1.2}$$

Los métodos numéricos de un paso que se van a utilizar están expresados por aplicaciones Ψ_h de R^d en R^d que avanzan la solución h unidades de tiempo. Supondremos que $\Psi_h(x)$ depende regularmente de h y de x y que constituye un método numérico de orden r, es decir, que el error local satisface

$$\varphi_h(x) - \Psi_h(x) = O(h^{r+1})$$

siendo φ_h el flujo del sistema (1.1). Además, se supondrá también que

$$\varphi_h^{'}(x) - \Psi_h^{'}(x) = O(h^{r+1}).$$

Las ventajas que se pretenden mostrar son las relativas a los métodos reversibles, es decir, métodos que cumplen la siguiente igualdad:

$$\rho\Psi_h\rho\Psi_h = I.$$

Se eligen precisamente estos métodos porque el hecho de que el sistema sea reversible es equivalente a que la función flujo del sistema ϕ_h satisfaga también esta igualdad.

Para una gran cantidad de métodos, dicha relación se cumple si y sólo si el método es autoadjunto ([4], [5]). Existen una gran cantidad de métodos de este tipo. Sin embargo, es interesante señalar una forma fácil de obtenerlos a partir de un integrador numérico muy general ϕ_h. Esta es considerar $\Psi_h = \phi_{\frac{h}{2}} \circ \phi^*_{\frac{h}{2}}$. Por tanto, dado un integrador ϕ_h eficiente en el sentido de que produce un error local pequeño, se esperará de Ψ_h que también sea eficiente con la ventaja de que por ser reversible cumplirá además una serie de propiedades, que para determinadas aplicaciones pueden hacerlo más conveniente.

2 Pasos variables en métodos reversibles

En el caso de que, al considerar paso variable, queramos seguir conservando la reversibilidad, son necesarias unas técnicas distintas de las habituales. Consideremos una cierta función s definida en $R^d \times [-1, 1]$ tal que

$$s_{\min} \leq s(x, \epsilon) \leq s_{\max},$$

para ciertas constantes positivas $s_{\min}$ y $s_{\max}$, para todo $x \in R^d$ y todo ϵ tal que $|\epsilon| \leq 1$. Si la función de longitud de paso en un cierto punto $x \in R^d$ viene dada por $\epsilon s(x, \epsilon)$, la reversibilidad del método se conserva si

$$s(x, \epsilon) \equiv s(\rho y, \epsilon) \tag{2.3}$$

donde $y = \Psi_{\epsilon s(x,\epsilon)}(x)$, en cuyo caso

$$\rho\Psi_{\epsilon s(\rho y,\epsilon)}(\rho y) = \rho\Psi_{\epsilon s(x,\epsilon)}(\rho y) = [\Psi_{\epsilon s(x,\epsilon)}]^{-1}(y) = x.$$

Existen varias técnicas sugeridas por Stoffer [5] para conseguir (2.3). En nuestros experimentos, tan sólo hemos utilizado la sugerida por Hut et al [3]. Supongamos que τ es una cierta función de R^d en R cumpliendo $\tau \circ \rho = \tau$ y tal que $\epsilon\tau(x)$ proporciona una longitud de paso adecuada para integrar en el punto x y lograr mayor precisión a medida que ϵ disminuye. En ese caso, el valor $h = \epsilon s(x, \epsilon)$ que cumple

$$h = \frac{\epsilon}{2}[\tau(x) + \tau(\Psi_h(x))] \tag{2.4}$$

satisface (2.3).
Puede comprobarse que efectivamente la ecuación (2.4) define h de forma implícita. Para calcular h en la práctica, se hace necesario utilizar la iteración de punto fijo

$$h^{(n)} = \frac{\epsilon}{2}[\tau(x) + \tau(\Psi_{h^{(n-1)}}(x))],$$

con lo cual aumenta el costo computacional al tener que calcular $\Psi_{h^{(n-1)}}(x)$ en cada iteración. Para reducir en cierta forma este costo, existe la posibilidad de utilizar extrapolación, es decir, utilizar como iterante inicial para el tercer paso en adelante

$$h^{[0]}_{n+1} = 2h_n - h_{n-1}$$

donde h_n y h_{n-1} sean los pasos anteriormente tomados. El proceso iterativo se interrumpirá cuando $h^{[j]}_{n+1} \approx h^{[j-1]}_{n+1}$.

Los siguientes experimentos muestran que esta técnica da lugar a una elección de paso muy aceptable.
Se va a integrar el problema de Kepler

$$p_i^{'} = -\frac{q_i}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}^{\frac{3}{2}}} \qquad q_i^{'} = p_i \qquad i = 1, 2,$$

con condiciones iniciales $q_1(0) = 1 - e$, $q_2(0) = 0$, $p_1(0) = 0$, $p_2(0) = \sqrt{\frac{1+e}{1-e}}$. Este problema de valores iniciales tiene como solución una órbita periódica con forma de elipse.
El integrador numérico reversible que utilizamos es la composición del método de Calvo [1] con su adjunto, segun se señaló en la primera sección. El método de Calvo es un método simpléctico de orden 4, que resulta de minimizar los coeficientes que aparecen en el término principal del error local. Se ha probado numéricamente que dicho método es muy efectivo para sistemas Hamiltonianos. En la implementación del paso variable, se han tenido en cuenta las consideraciones anteriores, tomando como función τ la sugerida en [3]

$$\tau(p_1, p_2, q_1, q_2) = \min\{\frac{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}}{\sqrt{p_1^2 + p_2^2}}, \frac{\pi}{2\sqrt{2}}(q_1^2 + q_2^2)^{\frac{3}{4}}\}.$$

La primera función entre llaves es el tiempo que tardaría el cuerpo que recorre la órbita en llegar al centro de fuerzas con su velocidad actual. La segunda función es el tiempo que tardaría en llegar dicho cuerpo en caída libre al centro de fuerzas.
Por otra parte, se integra numéricamente el mismo problema con el método de Dormand y Prince de orden 4, que integra muy eficientemente sistemas generales donde sea importante ajustar el paso.
Cuando se toma como excentricidad $e = 0.5$, si se comparan las longitudes de paso que toman ambos métodos en los diez primeros periodos, el primero para $\epsilon = \frac{1}{10}$, y el segundo con $tol = 10^{-5}$, puede observarse que no hay apenas diferencia (gráfica 1).

3 Crecimiento asintótico del error

Bajo las suposiciones de la introducción, para un método numérico no necesariamente reversible, y cuando se utiliza una sucesión de pasos de la forma $\epsilon s(x_n, \epsilon)$, se tiene que el error global puede expresarse de la siguiente forma ([2])

$$x_n - x(t_n) = \epsilon^r e_r(t_n) + \epsilon^{r+1} e_{r+1}(t_n) + \ldots + \epsilon^{2r-1} e_{2r-1}(t_n) + \epsilon^{2r-1} R_{2r-1}(t_n, \epsilon),$$

para ϵ suficientemente próximo a 0, donde las funciones e_m son funciones regulares en t (independientes de ϵ) y $R_{2r-1}(t, \epsilon)$ tiende hacia 0 uniformemente en intervalos de tiempo acotados.
Las funciones de error e_m satisfacen versiones no homogéneas de la ecuación variacional

$$\dot{e}_m = J(t)e_m + \sigma_m(t), \qquad e_m(t_0) = 0$$

donde los σ_m son términos fuente adecuados, y $J(t) = f^{'}(x(t))$.

Veamos ahora qué significa el teorema anterior en el caso de que la solución $x(t)$ sea una solución periódica de periodo T. En este caso, se cumple que los términos fuente $\sigma_m(t)$, $r \leq m \leq 2r-1$ son también periódicos.
De aquí, puede deducirse que si se denota por $e_m^{(N)}$ a $e_m(t_0 + NT)$, se tiene que

$$e_m^{(N)} = (\sum_{i=0}^{N-1} M_{t_0}^i) e_m^{(1)}, \qquad N = 1, 2, 3, \ldots \tag{3.5}$$

siendo $e_m^{(1)}$ el error tras el primer periodo y M_{t_0} la matriz de monodromía del sistema en t_0, es decir, la solución de

$$\frac{\partial M(t, t_0)}{\partial t} = J(t) M(t, t_0), \qquad M(t_0, t_0) = I$$

evaluada en $t_0 + T$. De una forma más gráfica, la matriz que lleva las perturbaciones de la condición inicial en las perturbaciones tras un periodo T salvo términos de orden 2.
Por tanto, el error tras N periodos depende exclusivamente de la matriz de monodromía (determinada por el problema diferencial) y el error tras un periodo, en el cual ya interviene el método numérico que se está considerando.
Denotemos por $X_+ = Ker(\rho - I)$, $X_- = Ker(\rho + I)$. Supongamos de ahora en adelante que la solución $x(.)$ del problema de valores iniciales reversible es periódica y simétrica, y que $x_0 \in X_+$. Entonces, la matriz de monodromía M_{t_0} es una matriz ρ-reversible, es decir,

$${M_{t_0}}^{-1} = \rho M_{t_0} \rho.$$

De esta propiedad se deduce por razonamientos de álgebra lineal que

$$Ker(M_{t_0} - I) = [Ker(M_{t_0} - I) \cap X_+] \oplus [Ker(M_{t_0} - I) \cap X_-]$$

y que

$$Ker(M_{t_0} - I)^2 = [Ker(M_{t_0} - I)^2 \cap X_+] \oplus [Ker(M_{t_0} - I)^2 \cap X_-]. \tag{3.6}$$

Por otra parte, de la reversibilidad de M_{t_0} se tiene también que la multiplicidad del autovalor 1 es necesariamente par. Además, 1 es siempre autovalor ya que derivando respecto de t en la igualdad

$$\varphi_T(x(t)) = x(t)$$

y evaluando en t_0, se tiene que

$$M_{t_0} f(x_0) = f(x_0).$$

Además, obviamente, a partir de (1.2) se tiene que $f(x_0) \in X_-$.
Por otra parte, en el caso de que a las condiciones anteriores se una que el integrador numérico sea reversible, se tiene que

$$e_m^{(1)} = -M_{t_0} \rho e_m^{(1)}. \tag{3.7}$$

Todas estas consideraciones pueden precisar cómo crece el error global en un gran abanico de ejemplos.

Consideremos el problema del oscilador lineal

$$\dot{p} = -kq$$
$$\dot{q} = p.$$

La función ρ que hace el sistema reversible es $\rho(p,q) = (-p,q)$. Todas las soluciones de este problema son órbitas circulares periódicas de periodo $\sqrt{2\pi/k}$. Es obvio que en este caso la matriz de monodromía asociada al sistema es la matriz Identidad, con lo cual utilizando (3.5) se tiene que

$$e_m^{(N)} = N e_m^{(1)},$$

independientemente de cuál sea el método empleado para la integración.
En el caso particular de que el integrador sea reversible, (3.7) nos dice que que $e_m^{(1)}$ toma sólamente la dirección de $f(x_0)$.
Para otros ejemplos, conviene darse cuenta de que si existe una cierta cantidad I invariante a lo largo de la órbita, y ρ es una involución ortogonal que también deja invariante I, entonces $\nabla I(x_0) \in X_+$.
Consideremos ahora las órbitas periódicas correspondientes al problema del péndulo

$$\dot{q} = p, \qquad \dot{p} = -\sin q,$$

donde la función ρ que hace el sistema reversible es la misma del ejemplo anterior. Se tiene que el espacio de fases debe ser necesariamente $Ker(M_{t_0} - I)^2$. $f(x_0)$ será un autovector de X_- y si H es la energía del sistema $\nabla H(x_0)$ será necesariamente un autovector generalizado de X_+, pues sino la matriz de monodromía sería la identidad, en contra de que los periodos de las órbitas dependen de la energía de cada problema de valores iniciales. Teniendo en cuenta (3.5), para un método numérico general, el error crecerá cuadráticamente. Sin embargo, si el método es reversible, aplicando directamente la condición (3.7), se deduce inmediatamente que $e_m^{(1)}$ sólo puede tener componente en la dirección de $f(x_0)$. De aquí se obtiene un crecimiento lineal del error global.
Veamos ahora qué ocurre con el problema de Kepler. Este problema es ρ-reversible respecto de la involución

$$\rho(p_1, p_2, q_1, q_2) = (-p_1, p_2, q_1, -q_2).$$

Dicho problema tiene dos integrales primeras, la energía total del sistema

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}},$$

y el momento angular

$$M = q_1 p_2 - q_2 p_1.$$

Por otra parte, se sabe [1] que para este problema

$$M_{t_0} = I - T'(H(x_0)) f(x_0) (\nabla H)^T(x_0)$$

donde

$$T = T(H) = \frac{2\pi}{\sqrt{(2|H|)^3}}$$

es el periodo de las órbitas de energía H. Se tiene, por tanto, que $Ker(M_{t_0} - I) =< \nabla H(x_0) >^T$ y por tanto, la dimensión de este espacio es 3. De aquí, para un método general, considerando (3.5), habrá crecimiento cuadrático del error. Por otro lado, $\nabla H(x_0)$ y $\nabla M(x_0)$ pertenecen a X_+. Como $\nabla H(x_0)$ obviamente no es autovector, de (3.6) se deduce que no existe autovector generalizado en X_-. Considerando este hecho en (3.7), cuando se utiliza un método reversible, se deduce que $e_m^{(1)}$ es siempre un autovector en la dirección de X_-. Esto implica de nuevo, por (3.5), un crecimiento lineal del error.
Este hecho se plasma en la gráfica 2, donde se integra el problema de Kepler con el método descrito en la sección anterior. La excentricidad considerada es 0.5 y los tiempos finales 10,30,90,$\ldots$,21870 periodos. Los valores de ϵ correspondientes a cada uno de los trazos continuos son 1/80, 1/160, 1/320. Sin embargo, en la gráfica 3, donde se utiliza el método de Calvo con la técnica de paso reversible, el crecimiento del error es cuadrático, al igual que en la gráfica 4 donde $s(x, \epsilon) = \epsilon\tau(x)$ y el método utilizado es el reversible.
Este comportamiento asintótico del error global hace a los métodos reversibles muy competitivos cuando se integra hasta tiempos largos. Véase la siguiente gráfica donde se representan las evaluaciones de función frente al error tras 21870 periodos, cuando se integra el problema de Kepler con $e = 0.9$. Las aspas corresponden al método de Dormand y Prince con tolerancias 10^{-11},10^{-12},10^{-13}, y los símbolos + al método reversible descrito con $\epsilon = 1/40, 1/80, 1/160, 1/320$.

4 Conclusiones

Los métodos reversibles son métodos muy competitivos en la integración de sistemas reversibles. Comparten con los simplécticos de paso fijo el buen comportamiento asintótico del error. Por otra parte, al conservar esta propiedad también en la implementación con paso variable, permiten superar a los métodos más eficientes hasta el momento en la integración de problemas de gran variabilidad a lo largo de la solución.

Referencias

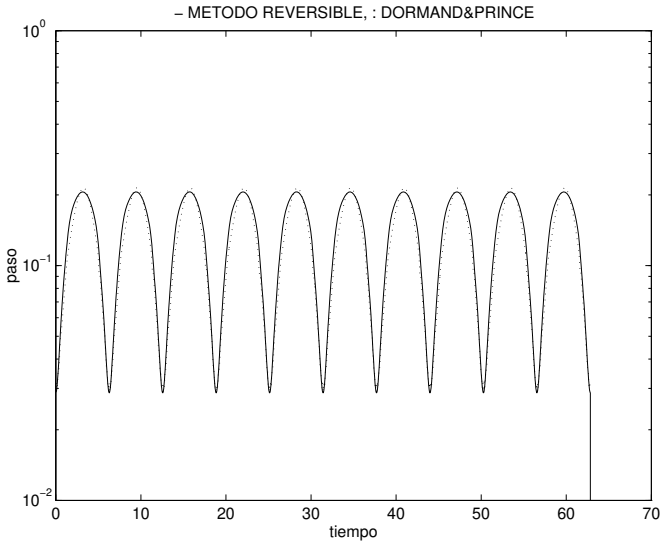
[1] M. P. Calvo and J. M. Sanz-Serna, *The development of variable-step symplectic integrators, with application to the two-body problem,* SIAM J. Sci. Comput., 14 (1993), pp. 936-952.

[2] B. Cano & J. M. Sanz-Serna, *Error growth in the numerical integration of periodic orbits, with application to Hamiltonian and reversible systems.* Applied Mathematics and Computation Reports, Universidad de Valladolid, Report 1995/1, January 1995.

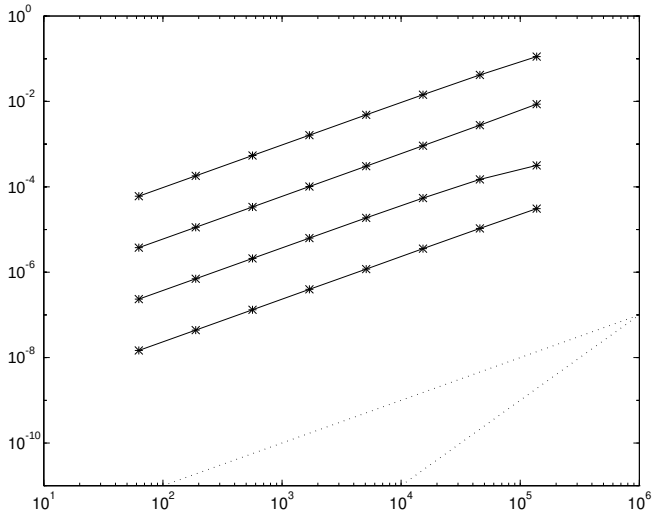
[3] P. Hut, J. Makino and S. McMillan, *Building a better leapfrog,* Report IASSNS-AST 93/74, Astrophysics Preprint Series, The Institute for Advanced Study, Princeton, 1993.

[4] D. Stoffer, *On reversible and canonical integration methods,* Res. Rep. No. 88-05, Applied Mathematics, Eidgenoessische Technische Hochsshule (ETH), Zürich, 1988.

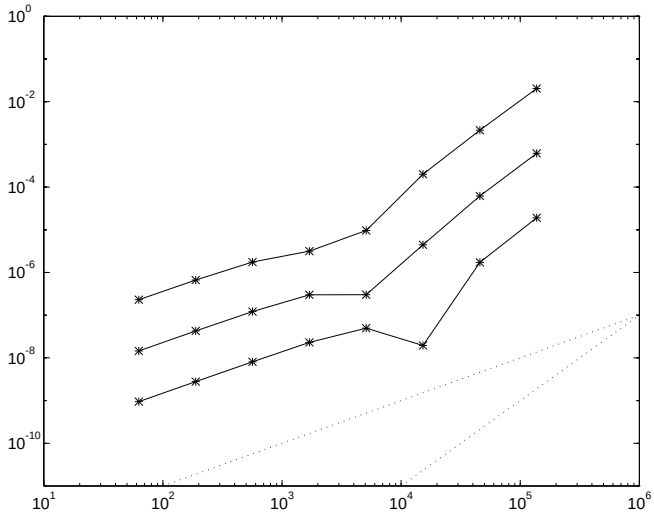
[5] D. Stoffer, *Variable steps for reversible integration methods,* preprint.



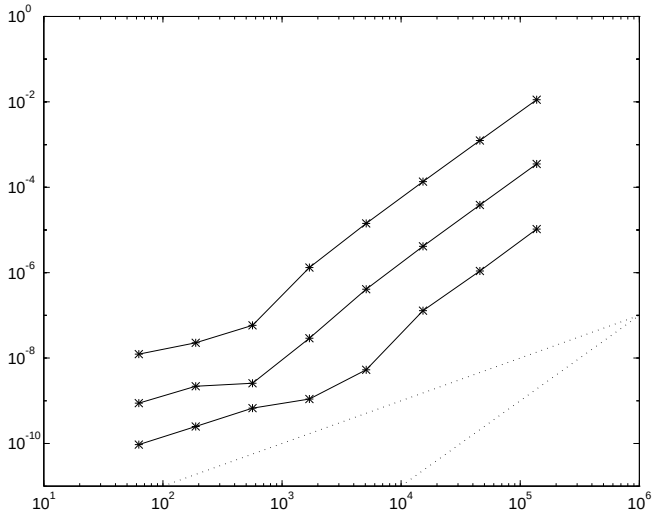
GRAFICA 1: Longitudes de paso tomadas



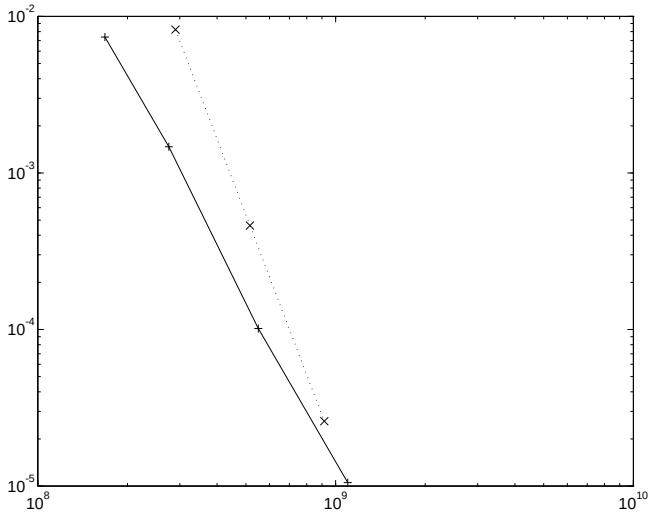
GRAFICA 2: Crecimiento del error. MRPR



GRAFICA 3: Crecimiento del error. MNRPR



GRAFICA 4: Crecimiento del error. MRPNR



GRAFICA 5: Eficiencia